数理解析研究所講究録
115巻 1971年 189-192

体心，面心立方格子グリーン函数と複素母数の完全楕円積分の計算

東北大工，*理　寺田徹，*堀口剛

体心立方格子系のグリーン函数の原点での値は

$$G(t) = \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \int_0^\pi dz \, \frac{1}{t - \cos x \cos y \cos z}$$

で与えられる。この値は $t > 1$ においては第一種完全楕円積分 $K(k)$ を用いて

$$G(t) = \frac{4}{\pi^2}\frac{1}{t} K(k)^2 \qquad (1)$$

$$k = \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{t^2} \right)^{1/2} \right]^{1/2} \qquad (2)$$

と表わされることが知られている。[1)] $t > 1$ では母数 k は $0 < k < 1$ で，この範囲での $K(k)$ は算術幾何平均法により計算することができる。[2)] $t = s - i\epsilon$ $(\epsilon \gtrsim 0)$, $0 < s < 1$ とすると k の値は複素数値を取る。したがって，もし複素数値の k に対する $K(k)$ が計算されれば，体心立方格子グリ

ーン函数の原点での値は $0<s<1$ でも上式により計算できることになる．

筆者等は算術幾何平均法が複素母数の場合にも使えることを確めた。すなわち，第一種完全楕円積分の場合

$$K(k) = \lim_{N\to\infty} \frac{\pi}{2a_N} \qquad (3)$$

ただし a_N は

$$a_0 = 1 \qquad b_0 = k' \equiv (1-k_0^2)^{1/2}$$
$$a_n = \frac{a_{n-1}+b_{n-1}}{2}, \quad b_n = (a_{n-1}\, b_{n-1})^{1/2} \qquad (4)$$

により与えられる。ただし平方根の偏角は常に $-\pi/2$ と $\pi/2$ の間に取るものとする．収束は，$K(k)$ を $\pi/(2a_N)$ で近似するときの誤差を 10^{-12} におさえるためには N を

$$10^{-1} < |k'| < 10 \quad なら \quad N=4$$
$$10^{-10} < |k'| < 10^{10} \quad なら \quad N=7 \qquad (5)$$
$$10^{-100} < |k'| < 10^{100} \quad なら \quad N=10$$

と取ればよいことが確められている。N を1増すとき誤差は2乗になる．

面心立方格子についても格子グリーン函数の原点での値を第一種完全楕円積分の積で表わす表式が $s>3$ および $s<-1$ で与えられている。[3] この場合には楕円積分の適当な解析接続が必要となるが，$-1<s<3$ での値は算術幾何平均法により計算できることが示される。[4]

筆者達は立方格子グリーン函数の原点での値の数表[5]の作成に当り，体心，面心立方格子については上記の方法を用いた。単純立方格子については昨年の報告[6]に与えた積分を用いた。

最後に桂，堀口[7]は体心立方格子グリーン函数に対する上記 Maradudin の表式 (1), (2) を解析接続することにより $0<s<1$ での値の実部，虚部を超幾何函数により表わしていること附記しておく。

文献

1) A. A. Maradudin et al., Acad. Roy. Belg., Classe Sci., IX, No. 7 (1960).

2) M. Abramowitz and I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions (New York, Dover, 1965).

3) G. Iwata, Natural Science Rep., Ochanomizu Univ., 20 (1969) 13.

4) T. Morita and T. Horiguchi, J. Math. Phys. (1971) to appear.

5) T. Morita and T. Horiguchi, Table of the Lattice Green's Function for the Cubic Lattices (Values at the Origin) (1971) to appear.
この表に関する質問は東北大学工学部応用理学教室，応用数学研究グループに書かれたい。

6) 守田，堀口，数理解析研究所講究録 91 (1970) 199.
T. Morita and T. Horiguchi, J. Phys. Soc. Japan (1971) to appear

7) S. Katsura and T. Horiguchi, J. Math. Phys. (1971) to appear.